

Interface tangible modulaire, articulée et sans marqueur dédiée à la pédagogie et à la recherche en biologie moléculaire

Nicolas Férey^{1,2}, Bastien Vincke³, et Mohamed Anis Ghaoui³

¹Laboratoire de Biochimie Théorique (LBT - UPR CNRS 9080), Institut de Biologie Physico-Chimique (IBPC), Paris (France)

²Laboratoire Interdisciplinaire des Sciences du Numérique (LISN – UMR 9015), Univ. Paris-Saclay, CNRS, Orsay (France).

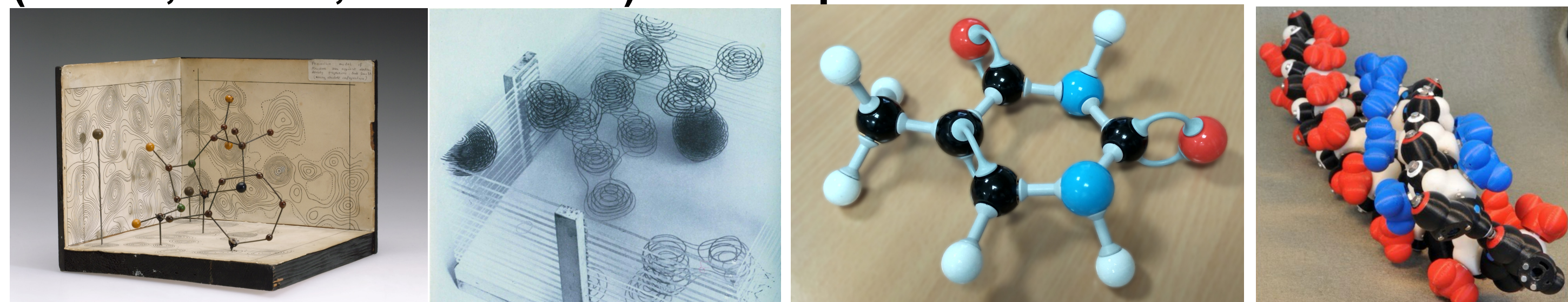
³Laboratoire des Systèmes et Applications des Technologies de l'Information et de l'Energie (SATIE – UMR 8029), Univ. Paris-Saclay, ENS Paris-Saclay, CNRS, Orsay (France).

Les interfaces tangibles, c'est quoi ?

Ce sont des techniques d'interaction humain-machine qui consistent à **manipuler un objet numérique en utilisant une représentation physique** de cet objet. Elles mobilisent en général l'usage de capteurs, d'électronique embarquée, d'objets communicants, ou de traitement d'image pour les rendre actives et pour reconstruire leur jumeau numérique, ou déclencher une commande.

Pourquoi des interfaces tangibles moléculaires ?

La biologie moléculaire a toujours beaucoup utilisé les modèles physiques. Avant l'informatique, les **modèles physiques complexes pouvaient être le résultat de travaux de toute une vie**. Si la modélisation *in silico* a révolutionné le domaine, car elle comporte évidemment de nombreux avantages (flexibilité et rapidité de rendus visuels), **la manipulation**, l'édition et l'exploration de ces modèles souvent complexe à travers des dispositifs d'interaction humain-machine classiques (souris, clavier, interface 3D) restent peu efficaces.



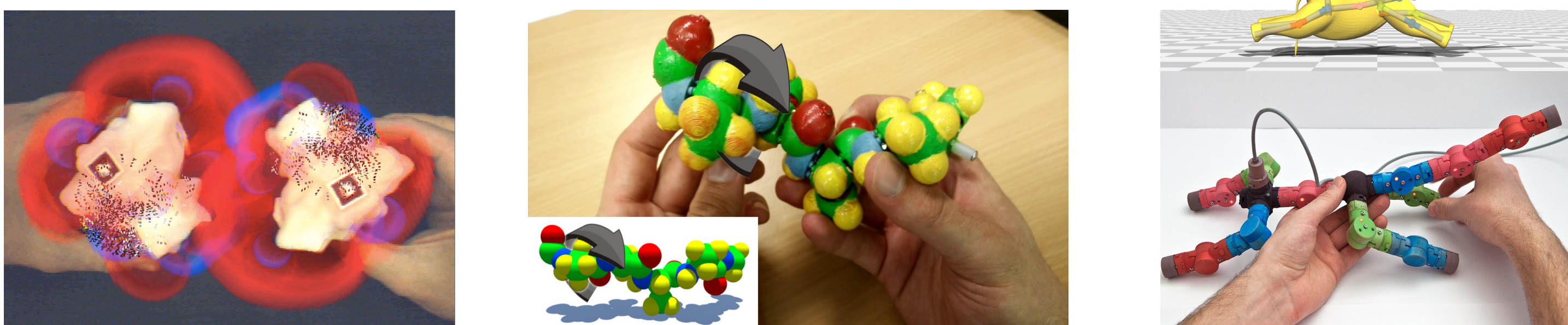
Hodgkin, pénicilline

MolyMod®

Peppyptides [1]

Inspirations

Nos travaux sont inspirés par les résultats de pionnier dans le domaine des interfaces tangibles moléculaires comme Arthur J. Olson [2], associés à des études démontrant les avantages d'interfaces tangibles pour manipuler des objets numériques 3D articulées [3] ou des modèles physiques en facilitant l'apprentissage de la biologie moléculaire [4].



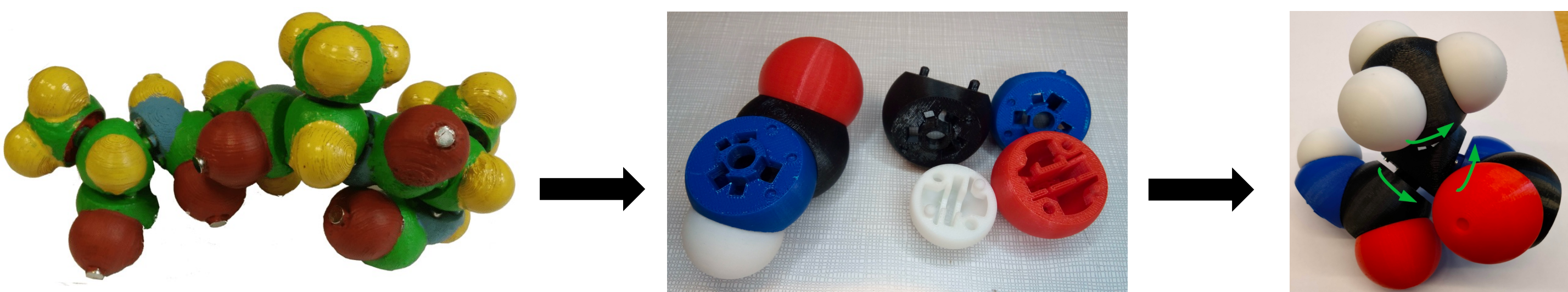
Olson [2]

Martinez [5]

Jakobson [3]

Motivations : modulaire, sans fil et sans marqueur

Notre objectif est de **concevoir une interface tangible modulaire, articulée, et sans fil et sans marqueur**, fils et marqueurs qui restaient rédhibitoires en termes d'utilisabilité. La suppression de ces marqueurs grâce à la miniaturisation et aux technologies issues de l'internet des objets, a nécessité de mettre ensemble des compétences en biologie moléculaire, en informatique, et en électronique [6] pendant plusieurs années. Nous nous sommes **basés sur le modèle physique très réaliste Peppyptide [1]**, modèle permettant de construire de manière modulaire de petits peptides, de reproduire les structures secondaires usuelles et de ressentir les puits de potentiel des angles dièdres avec des aimants.



Références

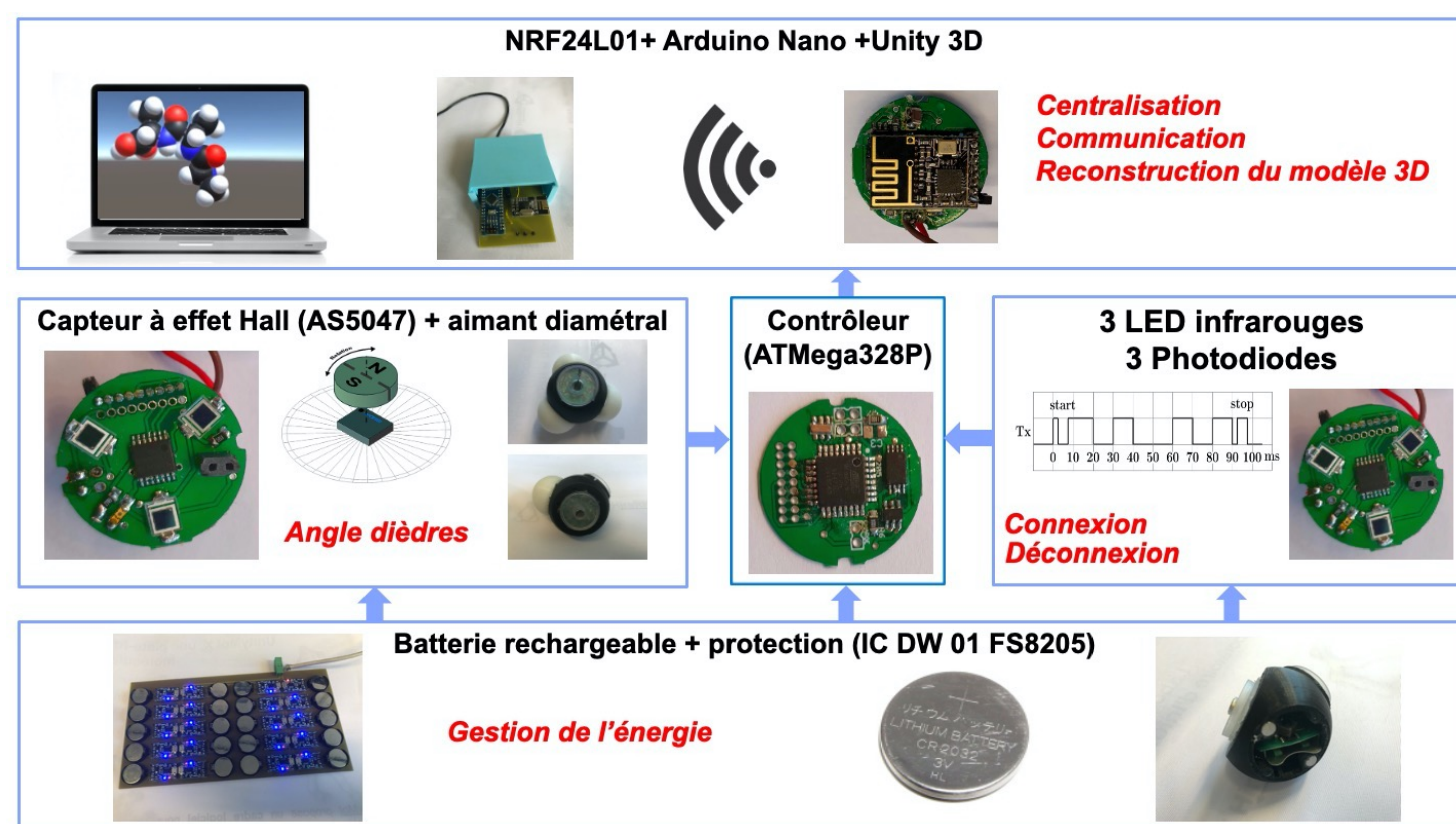
- Chakraborty, P.; Zuckermann, R.N. **Coarse-grained, foldable, physical model of the polypeptide chain**. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2013, 110, 13368–13373.
- Gillet, A.; Sanner, M.; Stoffler, D.; Olson, A. **Tangible interfaces for structural molecular biology**. *Structure* 2005, 13, 483–491.
- Jacobson, A.; Panozzo, D.; Glauser, O.; Pradalier, C.; Hilliges, O.; Sorkine-Hornung, O. **Tangible and modular input device for character articulation**. *ACM Trans. Graph. (TOG)* 2014, 33, 82.
- Newman, D. L.; Stefkovich, M.; Clasen, C.; Franzen, M.A.; Wright, L. K. **Physical models can provide superior learning opportunities beyond the benefits of active engagements** *Biochem. Mol. Biol. Educ.* 2018, 46(5): 435–444.
- Martinez X.; Férey, N.; Vézien, J.; Bourdot, P. **3D reconstruction with a markerless tracking method of flexible and modular molecular physical models: towards tangible interfaces**, *Journal of Virtual Reality and Broadcasting*, 2019, 14(2017).
- Vincke, B.; Ghaoui, M. A.; Férey, N.; Martinez, X. **Modular and Articulated Interface for Interactive Molecular Manipulation**, *Sensors* 2020, 20(18), 5415

Comment ça marche ?

Pour rendre actif ce modèle physique moléculaire modulaire et articulé, **plusieurs évènements doivent être détectés** :

- la **connexion et la déconnexion** de composant, dont on doit pouvoir déterminer le type (Amide, CA, Méthyl, CTer, NTer) ;
- les changements d'**angles dièdres**.

Il s'agit ensuite d'assurer la **centralisation, le traitement et la transmission** des informations collectées au logiciel de **reconstruction 3D**.

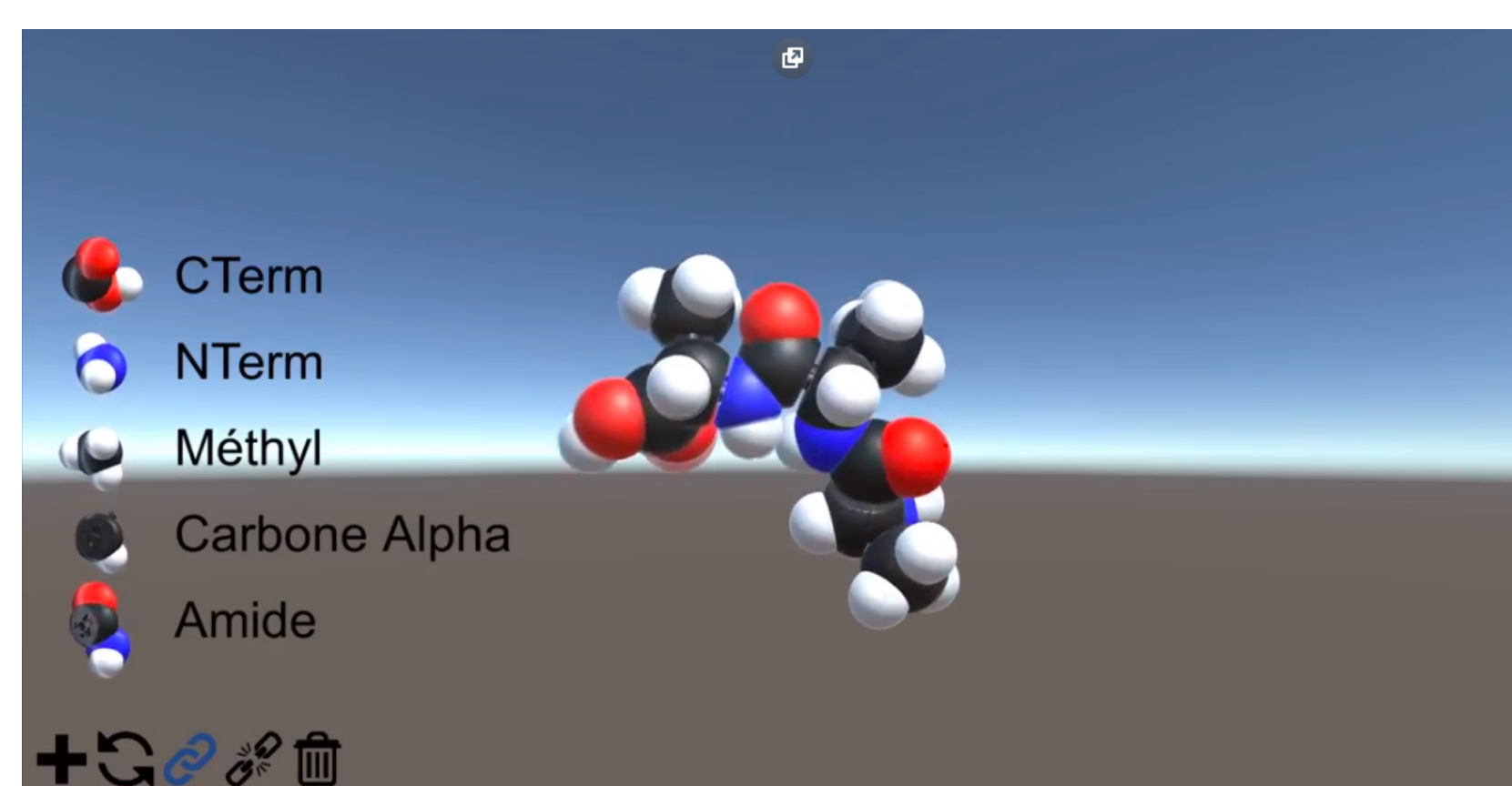


Autopsie d'un composant moléculaire gros grain de l'interface tangible

Evaluation et expérience utilisateur

Cette interface fait l'objet d'évaluation pour mesurer sa précision et l'expérience utilisateur. Les premiers résultats indiquent :

- un **temps de reproduction d'une conformation beaucoup moins important** qu'avec une interface classique ;
- une **bonne précision (RMSD) avec la modalité tangible** mais qui reste **meilleure avec la modalité classique**, le compromis temps/précision restant en faveur de la modalité tangible ;
- une **meilleure expérience utilisateur pour la modalité tangible** confirmée par l'analyse des interviews post-expérimentation.



Modalité classique (souris, interface 3D)

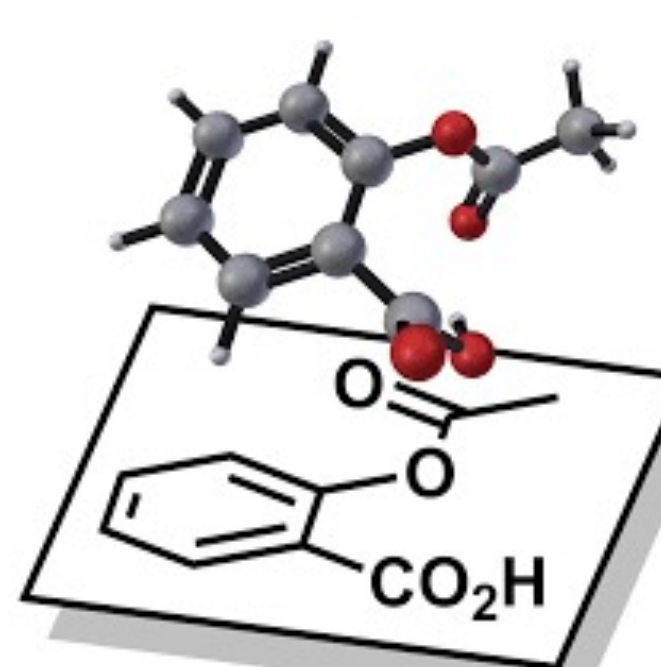


Modalité tangible

Travaux en cours et perspectives

Voici les travaux en cours et les perspectives de cette approche :

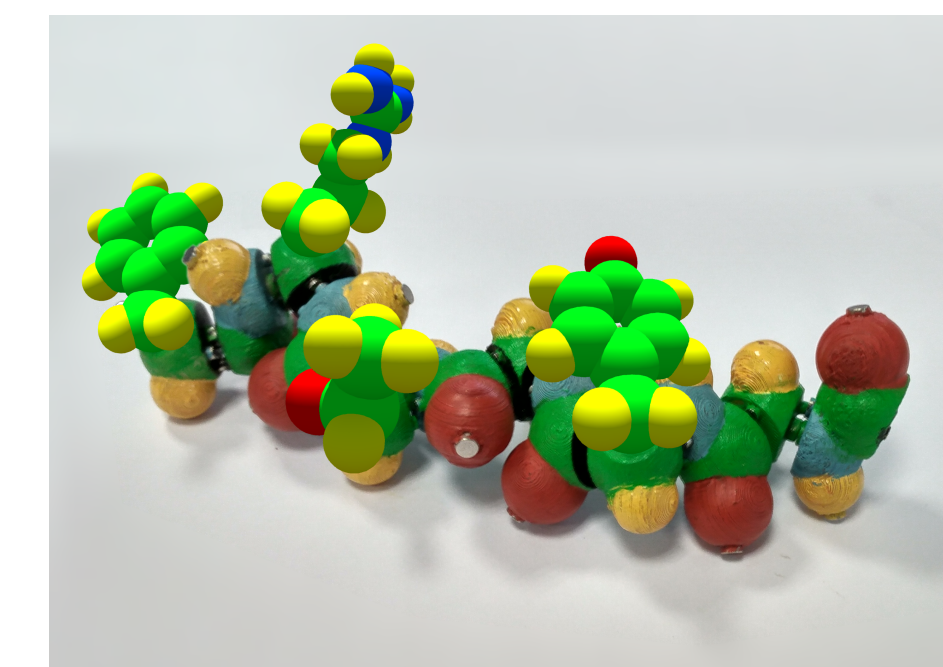
- utiliser une interface tangible **dans une simulation moléculaire** ;
- **identifier applications et usages**, en pédagogie, en recherche scientifique et dans l'industrie (*Rational Drug Design*) ;
- extension à tous les acides aminés, puis à **tout type de molécules** ;
- vers une application en **Réalité Mixte/Réalité Augmentée**.



MolecularAR



UnityMol + HoloLens



Réalité mixte (vue d'artiste)

Remerciements

Ces travaux ont été financés par nos tutelles, et par l'Institut Farman 3 années consécutives sous le nom du projet *BIOTIN'IT*. Nous avons ensuite obtenu un financement de l'Agence Nationale pour la Recherche dans le cadre du projet *ANR-PIRATE 2021*.